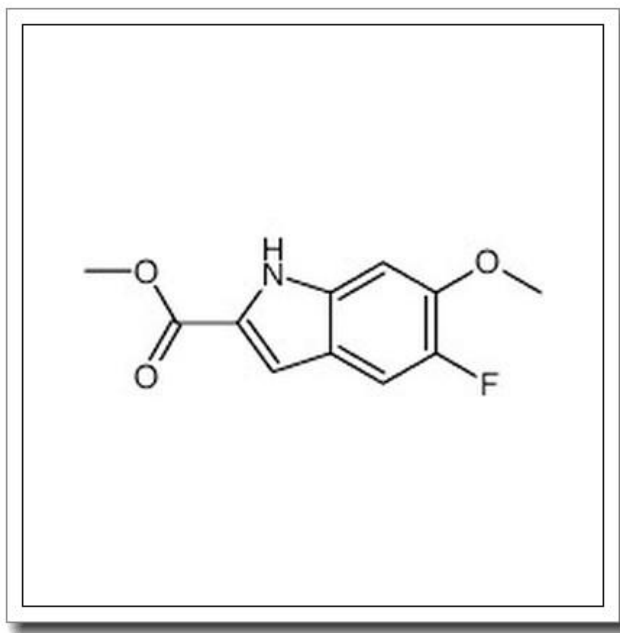


5-氟-6-甲氧基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯

methyl 5-fluoro-6-methoxy-1H-indole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5-fluoro-6-methoxy-1H-indole-2-carboxylate
中文名称	5-氟-6-甲氧基-1H-吲哚-2-羧酸甲酯
CAS 号	136818-64-9
分子式	C ₁₁ H ₁₀ FN ₃
分子量	223.2
纯度	>96%

产品说明

5-氟-6-甲氧基-1H-吡啶-2-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氟-6-甲氧基-1H-吡啶-2-羧酸甲酯 (CAS 号: 136818-64-9) 是一种含氟吡啶类衍生物, 分子式为 $C_{11}H_{10}FN_2O_3$, 分子量 223.2。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有典型的吡啶环结构和氟代甲氧基修饰, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。其熔点和溶解度数据需根据实测条件提供, 建议通过 HPLC 或 NMR 验证批次特异性参数。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶骨架的氟化衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。氟原子的引入可增强脂溶性和代谢稳定性, 而甲氧基修饰能调节分子极性和靶标结合能力。其结构特征使其成为激酶抑制剂、GPCR 配体等药物研发的关键中间体, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物设计中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域: 一是作为先导化合物用于结构-活性关系 (SAR) 研究, 优化生物活性; 二是用于构建复杂杂环体系, 如合成具有抗增殖活性的吡啶并吡啶类衍生物; 三是在放射性标记研究中作为示踪剂前体。实验室级产品适用于毫克至克级有机合成, 工业级需另行确认规格。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免吸湿, 溶解性测试推荐优先选用 DMSO 或甲醇。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议配合质谱或核磁进行反应监测以确保转化率。

5. 质量控制与安全信息

每批次产品均提供 HPLC 纯度报告 (>96%) 和 COA 分析证书。急性毒性数据尚未完全建立, 处理时需穿戴防护装备 (手套、护目镜、防尘口罩)。废弃物应作为有害

化学品处置，不可直接排入下水道。运输分类为非危险品，但建议按一般化学品规范包装。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件验证。更多技术参数可联系技术支持部门获取。